

Эффективность использования потенциалов разделения при оптимизации каскадов

Палкин В.А. (Уральский федеральный университет, г. Екатеринбург)

Для эффективного разделения изотопов необходим каскад с минимальным числом разделительных элементов, имеющих максимальную разделительную способность, которая рассчитывается с помощью потенциала разделения. Определению потенциала разделения посвящено множество работ. Основополагающими из них являются работы, в которых потенциал определен для разделения бинарных смесей исходя из аксиоматического подхода [1]. Этот потенциал описывает процессы разделения при малом и большом симметричном обогащении на элементах. При распространении аксиоматического подхода на другие случаи разделения возникают противоречия.

Для их преодоления в работе [2] изменены аксиомы и получены новые формулы для расчета потенциала и разделительной способности. В других работах предложено исходить только из одной аксиомы – независимости разделительной способности элементов от свойств смеси [3–7]. Были рассмотрены также идеальные каскады с разными коэффициентами разделения ступеней и R -каскады с одинаковой относительной концентрацией ключевых компонентов на входах ступени [8–10]. Еще одним подходом стало введение потенциала разделения с помощью моделей идеализированных процессов [11–13].

Потенциалы отражают особенности разделения бинарных и многокомпонентных смесей изотопов и существенно различаются. В связи с этим возникает вопрос об их проверке с точки зрения оптимизации каскадов.

В настоящей статье рассмотрен вычислительный эксперимент по оптимизации ординарных трехпоточных каскадов, работающих по противоточной симметричной схеме, методом варьирования срезов парциальных потоков ступеней по критерию максимальной разделительной способности элементов [14]. Разделительная способность элемента определялась отношением разделительной способности каскада, рассчитываемой по выбранному потенциалу, к суммарному потоку. Полученные при оптимизации внешние

параметры каскадов задавались в качестве исходных для минимизации суммарного потока. Если минимизация не приводила к существенному изменению суммарного потока, то делался вывод об эффективности потенциала. В расчетах каскадов для разделения бинарной смеси изотопов использовались потенциалы [1, 3, 5]. Для многокомпонентной смеси исследовались возможности применения потенциалов [4, 9, 12]. Еще одним объектом исследований являлся потенциал разделения [2], зависящий только от концентраций изотопных компонентов и отличающийся этим от других.

Особенности оптимизации каскадов. Ординарный каскад состоит из n последовательно соединенных ступеней с подачей питания в f -ю ступень (см. рисунок). Его внешними параметрами являются потоки питания, отбора и отвала F, P, W ; концентрация i -го изотопа в этих потоках $C_i^F, C_i^P, C_i^W, i = \overline{1, m}$; m – число компонентов изотопной смеси (для бинарной смеси $m = 2$).

Внешние параметры каскада удовлетворяют уравнениям баланса

$$F = P + W; \quad FC_i^F = PC_i^P + WC_i^W, \quad i = \overline{1, m}.$$

Аналогичные соотношения справедливы для ступеней:

$$L_j = L'_j + L''_j; \quad L_j C_{ij} = L'_j C'_{ij} + L''_j C''_{ij}, \quad i = \overline{1, m}, \quad j = \overline{1, n},$$

где L_j, L'_j, L''_j – поток питания, отбора и отвала j -й ступени; $C_{ij}, C'_{ij}, C''_{ij}$ – концентрация i -го изотопа.

Внутренними параметрами является совокупность потоков и концентрации ступеней каскада. К ним также относятся переменные n и f . Согласно схеме соединения ступеней в каскаде потоки вещества и парциальные потоки $L_{ij}, L'_{ij}, L''_{ij}$ компонентов смеси связаны соотношениями

$$L_1 = L''_2; \quad L_2 = L'_1 + L''_3; \quad \dots \quad L_f = L'_{f-1} + L''_{f+1} + F; \quad \dots \quad L_n = L'_{n-1};$$

$$L_{i1} = L''_{i2}; \quad L_{i2} = L'_{i1} + L''_{i3}; \quad \dots \quad L_{if} = L'_{if-1} + L''_{if+1} + FC_i^F; \quad \dots \quad L_{in} = L'_{in-1}, \quad i = \overline{1, m},$$

где $L_{ij} = L_j C_{ij}; L'_{ij} = L'_j C'_{ij}; L''_{ij} = L''_j C''_{ij}, j = \overline{1, n}$.

В расчетах принято, что коэффициент разделения i -го компонента

$$q_{ij} = \frac{C'_{ij} C''_{mj}}{C''_{ij} C'_{mj}}, \quad i = \overline{1, m}, \quad j = \overline{1, n},$$

является константой. Его задавали одинаковым по ступеням, т. е. $q_{ij} = q_i$. Для простоты также считалось, что все разделительные элементы в каскаде работают при одинаковых потоках питания. Поэтому их число в каскаде пропорционально суммарному потоку питания ступеней, т.е. $\sum_{j=1}^n L_j$.

С учетом граничных условий, которые выражаются в виде

$$L'_1 = W; \quad L'_n = P; \quad C''_{i1} = C_i^W; \quad C'_{in} = C_i^P, \quad i = \overline{1, m},$$

и условий нормировки концентрации (покомпонентная сумма равна единице) число независимых внешних и внутренних параметров каскада при фиксированных переменных n и f составляет $n + m$.

В качестве m независимых внешних параметров были выбраны поток и концентрация питания $m-1$ компонентов. Их задавали в каждом расчете по оптимизации каскада. Остальные n переменных варьировали по критерию максимальной разделительной способности элементов

$$\Delta U / \sum_{j=1}^n L_j \rightarrow \max, \quad (1)$$

где

$$\Delta U = PV(C_1^P, C_2^P, \dots, C_m^P) + WV(C_1^W, C_2^W, \dots, C_m^W) - FV(C_1^F, C_2^F, \dots, C_m^F), \quad (2)$$

ΔU – разделительная способность каскада; V – принятый потенциал разделения, зависящий от параметров в скобках.

В качестве варьируемых параметров выбран коэффициент σ_j , связанный со срезом ϕ_{ij} парциальных потоков каждой ступени соотношениями [2]

$$\phi_{ij} = L'_{ij} / L_j = \sigma_j q_i (1 + \sigma_j q_i), \quad j = \overline{1, n}.$$

Оптимизация проводилась методом [14] с вычислением на каждом шаге парциального потока компонентов смеси на отвале каскада

$$W_i = WC_i^W = FC_i^F (1 + \sum_{l=f+1}^n \prod_{s=l}^n \frac{\Phi_{is}}{1 - \Phi_{is}}) / (1 + \sum_{l=1}^n \prod_{s=l}^n \frac{\Phi_{is}}{1 - \Phi_{is}})$$

и парциального потока питания ступеней

$$L_{ij} = \frac{1}{\Phi_{ij}} (W_i \sum_{l=1}^j \prod_{s=l}^j \frac{\Phi_{is}}{1 - \Phi_{is}} - FC_i^F \sum_{l=f+1}^j \prod_{s=l}^j \frac{\Phi_{is}}{1 - \Phi_{is}}), \quad i = \overline{1, m}, \quad j = \overline{1, n}.$$

По ним последовательно рассчитывали зависимые параметры каскада: $W = \sum_{i=1}^m W_i$,

$$P_i = FC_i^F - W_i, \quad P = \sum_{i=1}^m P_i, \quad C_i^W = W_i / W, \quad L_j = \sum_{i=1}^m L_{ij} \quad \text{и т.д.}$$

После определения наилучших коэффициентов σ_j , $j = \overline{1, n}$, соответствующих максимуму

$\Delta U / \sum_{j=1}^n L_j$, рассчитывали оптимальный каскад по критерию минимального суммарного потока

$$\sum_{j=1}^n L_j \rightarrow \min \quad (3)$$

с аналогично заданными параметрами питания и концентрацией отбора и отвала целевого изотопа.

В соответствии с общим подходом построения каскадов, оптимальных по критерию (3) [16, 17], в расчетах варьировали n внутренних параметров, включая переменные n и f . При этом все внешние параметры для бинарного разделения являлись заданными. Для многокомпонентного разделения концентрацию отбора и отвала нецелевых изотопов определяли в процессе оптимизации.

Разделение бинарной смеси. Расчеты для бинарных смесей изотопов с использованием потенциала [1]

$$V(C) = (2C - 1) \ln \frac{C}{1 - C}, \quad (4)$$

где C – концентрация легкого изотопа, показали идентичность параметров каскадов, оптимизируемых по критериям (1) и (3). Различия в суммарном потоке даже при очень большом коэффициенте разделения $q = 20$ не превышают заданной точности его расчета $10^{-6} \%$. Это свидетельствует о целесообразности использования потенциала (4) для расчета

разделительной способности и определения эффективности разделения бинарных смесей изотопов в ступенях и элементах.

Особенностью оптимального каскада, рассчитанного по критерию (1), является изменение среза φ и коэффициентов разделения $\alpha = C'(1-C)/[(1-C')C]$ и $\beta = C(1-C'')/[(1-C)C'']$ по ступеням каскада. Для среза φ и коэффициента разделения β характерно уменьшение, для параметра α – возрастание значений от отвала к отбору. В результате удельная разделительная способность ступеней $\Delta U_c / L$ имеет большие значения, чем в соответствующем идеальном каскаде (разделительная способность ступени ΔU_c рассчитывается по формуле, аналогичной (2), с подстановкой параметров ступени). Выигрыш превышает потери разделительной способности от смешения, которых нет в идеальном каскаде [15].

В связи с изменяющимися вдоль каскада коэффициентами разделения α и β возникает вопрос о возможности применения при оптимизации потенциала разделения [3, 5], который в явном виде содержит эти коэффициенты:

$$V(C) = \varphi(\alpha, \beta) \left(\frac{1}{\varphi_b(\alpha, \beta)} C - \frac{1}{\varphi_a(\alpha, \beta)} (1-C) \right) \ln \frac{C}{1-C}, \quad (5)$$

где $\varphi(\alpha, \beta)$ – произвольная функция параметров α и β , которую можно принять $\varphi(\alpha, \beta) = \varphi_b(\alpha, \beta)$; $\varphi_b(\alpha, \beta) = \varphi_a(\beta, \alpha) = [\alpha(\beta-1) \ln \alpha - (\alpha-1) \ln \beta] / (\alpha\beta-1)$.

Потенциал (5) переходит в (4) при $\alpha = \beta$. Вычислительный эксперимент показал, что существенное отличие коэффициента разделения α от β в (5) не приводит к заметной разнице в суммарном потоке при оптимизации по критериям (1) и (3). Небольшая разница до 1 % возможна при $q \sim 10-20$, если коэффициенты разделения α и β различаются в несколько раз. Таким образом, оптимизация каскада по критерию максимальной разделительной способности (1), рассчитанной с потенциалом (5) при $\alpha \neq \beta$, не приводит к потере эффективности разделения. Получаемые таким способом каскады отличаются от рассчитываемых при $\alpha = \beta$ концентрацией C^P и C^W . Данный факт можно использовать для оптимизации каскада с заданным числом разделительных элементов на выбранную концентрацию отбора C^P .

Многокомпонентное разделение. Если в смеси присутствует небольшое число примесных изотопов, а основными являются два компонента, наиболее подходящим является потенциал разделения

$$V(C_1, C_2, \dots, C_m) = \left(\frac{\Delta M_{m1}}{\Delta M_{rs}} \right)^2 (C_r - C_s) \ln \frac{C_r}{C_s} + \sum_{i=1, i \neq r, s}^m \left(\frac{\Delta M_{m1}}{\Delta M_{ri}} \right)^2 C_i \ln \frac{C_i}{C_r}, \quad (6)$$

где $\Delta M_{ji} = M_j - M_i$ – разность молекулярной массы j -го и i -го изотопов; r, s – номер целевого и второго компонента смеси, на которые затрачивается основная часть разделительной способности каскада.

Потенциал разделения (6) является частным случаем общей формы [12]:

$$V_{C_1, C_2, \dots, C_m} = \sum_{\substack{i, j=1 \\ i < j}}^m \left(\frac{\Delta M_{m1}}{\Delta M_{ji}} \right)^2 (b_{ij} C_i - b_{ji} C_j) \ln(C_i / C_j), \quad (7)$$

где b_{ij} – коэффициенты, удовлетворяющие условию $\sum_{j=1}^m b_{ij} = 1$ при $i \neq j$. Они выбираются исходя из особенностей разделения. В частном случае формулы (6) b_{ij} заданы так, чтобы потенциал переходил в бинарную форму (4) при обращении в нуль концентрации примесных изотопов.

Данный вид потенциала оказался наилучшим для оптимизации разделения многокомпонентной смеси изотопов урана, в которой помимо основных изотопов $^{235, 238}\text{U}$ могут содержаться $^{234, 236, 232}\text{U}$. Параметры каскадов, оптимизированных по критерию (1) с использованием потенциала (6), соответствуют характеристикам каскада с минимальным суммарным потоком.

В табл. 1 для примера приведены данные о каскадах, разделяющих трехкомпонентную смесь изотопов урана. Каскады рассчитаны по критерию (1) при $n = 14, f = 5$. Коэффициент разделения ^{235}U по отношению к ^{238}U принят равным $q = 1,5$, ^{234}U – 1,72, поток питания $F = 10$ г/с, концентрация ^{235}U и ^{234}U – 0,711 и 0,0058 % соответственно. Для сравнения с каскадом, полученным с помощью потенциала (6), приведены три альтернативных.

Первый из них оптимизирован с помощью потенциала разделения

$$V(C_1, C_2, \dots, C_m) = \frac{1}{(m-1)} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^m \left(\frac{\Delta M_{m1}}{\Delta M_{ij}} \right)^2 (C_i - C_j) \ln \left(\frac{C_i}{C_j} \right). \quad (8)$$

Этот потенциал аналогичен введенному в статье [4] и является частным случаем (7) при $b_{ij} = b_{ji} = 1 / (m-1)$.

Второй каскад получен оптимизацией с использованием потенциала разделения

$$V(C_1, C_2, \dots, C_m) = (\Delta M_{m1})^2 \sum_{i=1}^m (1/a_i) C_i \ln(C_r / C_s), \quad (9)$$

где $a_i = \Delta M_{sr}(M_r + M_s - 2M_i) \neq 0$. Формула (9) соответствует потенциалу разделения для трехкомпонентной смеси из статьи [9]. Этот потенциал также является частным случаем (7) при подстановке $b_{rs} = b_{sr} = 1$, $b_{ri} = b_{si} = b_{ij} = 0$ при $i, j \neq r, s$, $b_{ir} = -(\Delta M_{ir})^2 / a_i$, $b_{is} = (\Delta M_{is})^2 / a_i$ [13]. При $C_i = 0$ для $i \neq r, s$ он переходит в бинарный потенциал (4).

Третий каскад оптимизирован с потенциалом разделения [2]

$$V(C_1, C_2, \dots, C_m) = \sum_{i=1}^m C_i \sum_{j=1}^m \ln(C_i / C_j), \quad (10)$$

Он соответствует потенциалу [4] при $m = 2$, однако не переходит в него при $C_i = 0$, $i \neq r, s$. Такую же особенность имеет потенциал разделения (8).

Как видно из табл. 1, для потенциалов (6) и (9) суммарные потоки каскадов, оптимизированных по критериям (1) и (3), одинаковы. Для потенциалов (8) и (10) наблюдается небольшое различие в пределах процента. Это объясняется различным характером изменения потенциалов разделения вблизи границы области $C_i = 0$, $i \neq r, s$. При коэффициенте разделения $q > 1,5$ разница в оптимизации по критериям (1) и (3) для потенциалов (8) и (10) увеличивается.

В табл. 2 для примера приведены данные о разделении трехкомпонентной смеси изотопов кремния в каскаде, оптимизированном по критерию (1) при $n = 20$, $f = 5$. Коэффициент разделения ^{28}Si по отношению к ^{30}Si принят равным $q = 2,0$, $^{29}\text{Si} - 1,41$, поток питания $F = 10$ г/с, концентрация ^{28}Si и ^{29}Si в питающей смеси 92,21, 4,71 % соответственно. Наибольшая разница в суммарном потоке при оптимизации по критериям (1) и (3) с точки зрения получения таких же внешних потоков и концентрации целевого изотопа ^{28}Si наблюдается для потенциала

(10) – 12 %. Такое большое различие обусловлено тем, что каскад с минимальным суммарным потоком требует существенно меньшего числа ступеней $n = 15$ и $f = 6$. Соответствие оптимизации по критериям (1) и (3) наблюдается для потенциалов (6) и (9).

Расчеты, проведенные для модельных смесей при условии значимой представительности каждого компонента, не дали однозначного результата. Так, при рассмотрении разделения трехкомпонентной смеси изотопов, аналогичной кремниевой, с концентрацией легкого и промежуточного изотопа 50 и 10 % оказалось, что потенциал разделения (6) является наилучшим при относительно небольшом коэффициенте разделения ступеней $q \sim 1,5$. При более высоком коэффициенте разделения $q \sim 5$ и длинных каскадах предпочтительнее применять потенциал (8).

Вопрос об эффективности потенциалов для многокомпонентного разделения требует дальнейшего изучения на примере конкретных изотопных смесей с определением правил выбора констант b_{ij} в общей форме потенциала (7). Кроме того, целесообразно установить критерии и целевые функции оптимизации, соответствующие другим потенциалам разделения.

Заключение. Для оптимизации разделения бинарных смесей применимы разные формы потенциалов, включающие их зависимость от коэффициентов разделения элементов. При разделении многокомпонентных смесей выбор потенциала разделения зависит от характеристик изотопной смеси и особенностей рассматриваемого процесса. Для урановых, кремниевых и других изотопных смесей, характеризующихся незначительным содержанием отдельных компонентов, предпочтительными являются потенциалы разделения (6) и (9).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Cohen K.** The theory of isotope separation as applied to the large scale production of ^{235}U . NY: McGraw-Hill, 1951. 165 p.
2. **Сазыкин А.А.** Термодинамический подход к разделению изотопов. – В кн.: Изотопы: свойства, получение, применение. Под ред. В.Ю. Баранова. М.: ИздАТ, 2000, с. 72–108.
3. **Lehrer-Ilamed Y.** On the value function for multicomponent isotope separation. – J. Nucl. Energy, 1969, v. 23, p. 559–567.

4. **Колокольцов Н.А., Николаев Б.И., Сулаберидзе Г.А., Третьяк С.А.** О функции ценности в каскадах для разделения многокомпонентной смеси. – Атомная энергия, 1970, т. 29, вып. 2, с. 128–130.
5. **Kanagawa A., Yamamoto I.** Value function and separative power for asymmetric separation process. – J. Nucl. Sci. Technol., 1977, v. 14, № 4, p. 282–287.
6. **Yamamoto I., Kanagawa A.** Synthesis of value function for multicomponent isotope separation. – Ibid., 1979, v. 16, № 1, p. 43–48.
7. **Kai T.** Theoretical analysis of ternary UF_6 gas isotope separation by centrifuge. – Ibid., 1983, v. 20, № 6, p. 491–502.
8. **Yamamoto I., Kanagawa A.** Separative power of ideal cascade with variable separation factors. – Ibid., 1978, v. 15, № 6, p. 426–432.
9. **Garza A., Garrett G., Murphy J.** Multicomponent isotope separation in cascades. – Chem. Engng. Sci., 1961, v. 15, p. 188–209.
10. **Wood H., Borisevich V.D., Sulaberidze G.A.** On a criterion efficiency for multi-isotope mixtures separation. – Separ. Sci. Technol., 1999, v. 34, № 3, p. 343–357.
11. **Палкин В.А.** Потенциал и разделительная способность в процессах разделения бинарных смесей изотопов. – Атомная энергия, 1998, т. 84, вып. 3, с. 253–259.
12. **Палкин В.А.** Обобщение решения Смородинского для потенциала разделения многокомпонентной смеси изотопов. – Там же, 2003, т. 95, вып. 5, с. 373–382.
13. **Palkin V.A.** On the value function for multi-isotope mixtures separation. – Ars Separatoria Acta, 2004, № 3, p. 51–61.
14. **Палкин В.А., Маслюков Е.В.** Расчет каскада с несколькими питаниями и отборами по срезам парциальных потоков. – Атомная энергия, 2012, т. 112, вып. 5, с. 309–313.
15. **Палкин В.А., Фролов Е.С.** Неоптимальные свойства идеального каскада с симметричными ступенями. – Там же, 2005, т. 99, вып. 3, с. 184–190.
16. **Палкин В.А.** Оптимизация каскада при произвольно заданных коэффициентах разделения ступеней. – Там же, 1997, т. 82, вып. 4, с. 295–301.

17. Палкин В.А., Сбитнев Н.А., Фролов Е.С. Расчет оптимальных параметров каскада для разделения многокомпонентных изотопных смесей. – Там же, 2002, т. 92, вып. 2, с. 130–133.

Т а б л и ц а 1. Характеристики оптимальных урановых каскадов

Потенциал разделения	P , г/с	C^P , %		C^W , %		$\sum_{j=1}^n L_j$, г/с	$(\sum_{j=1}^n L_j) \min$, г/с
		^{235}U	^{234}U	^{235}U	^{234}U		
(6)	0,940	5,098	0,051	0,256	0,001	368,9	368,9
(8)	0,768	5,695	0,059	0,286	0,001	339,7	338,4
(9)	0,940	5,099	0,051	0,256	0,001	368,9	368,9
(10)	0,745	5,898	0,061	0,293	0,001	334,2	330,9

Т а б л и ц а 2. Характеристики оптимальных кремниевых каскадов

Потенциал разделения	P , г/с	C^P , %		C^W , %		$\sum_{j=1}^n L_j$,	$(\sum_{j=1}^n L_j) \min$,
		^{28}Si	^{29}Si	^{28}Si	^{29}Si	г/с	г/с
(6)	5,50	99,68	0,31	83,09	10,08	831,7	831,7
(8)	6,02	99,43	0,57	81,28	10,98	722,2	698,3
(9)	5,51	99,68	0,32	83,05	10,10	832,3	832,3
(10)	6,57	99,10	0,90	79,05	12,00	671,2	592,8

ПЕРЕЧЕНЬ РИСУНКОВ

Схема противоточного симметричного каскада: 1, 2, f , $n-1$, n – номер ступени

